

## МОНОГЛИЦЕРОЛАТ ЦИНКА – НОВЫЙ БИОСОВМЕСТИМЫЙ ПРЕКУРСОР В ЗОЛЬ-ГЕЛЬ ПРОЦЕССЕ

*Бондарев А.Н., Штанько И.Н., Шадрина Е.В., Хонина Т.Г.*

Институт органического синтеза УрО РАН  
620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 22

Золь-гель синтез широко используется как метод препаративной химии, позволяющий получать разнообразные по структуре и свойствам практически ценные неорганические и органо-неорганические продукты в процессе перехода золя в гель.

Типичными прекурсорами в золь-гель процессе являются алкоксильные производные, среди которых наиболее часто используются тетраалкоксиды кремния и титана. Известно также использование полиолов кремния и титана в качестве прекурсоров для получения фармакологически активных гидрогелей. Эти гели проявляют ранозаживляющую, регенерирующую и транскутанную активность и перспективны для использования в качестве лекарственных средств топического применения в медицине и ветеринарии [1–3]. Известны полиолаты и других биогенных элементов, в частности, моноглицеролат цинка, обладающий разнообразной фармакологической активностью: иммуностропной, антибактериальной, противовирусной (препарат Glyzinc). Однако в патентной и научно-технической литературе отсутствуют сведения о возможности образования гидрогелей из моноглицеролата цинка.

Представляло научный и практический интерес синтезировать и изучить свойства новых биоактивных гидрогелей с использованием моноглицеролата цинка. Для расширения спектра фармакологической активности мы использовали комбинированные прекурсоры, полученные в избытке глицерина: моноглицеролат цинка состава  $\text{ZnC}_3\text{H}_6\text{O}_3 \cdot 6\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$  и тетраглицеролат кремния состава  $\text{Si}(\text{C}_3\text{H}_7\text{O}_3)_4 \cdot x\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_3$ , где  $0,5 \leq x \leq 10$  [1, 3]. Избыток глицерина придает необходимую консистенцию глицеролатам кремния и цинка, удобную для дальнейшего получения гидрогелей на их основе; в гелеобразовании замедляет процессы гидролиза и конденсации, играет роль пластификатора в образующихся гелях и препятствует синерезису.

Нами были получены новые кремнийцинксодержащие глицеро-гидрогели из моноглицеролата цинка и тетраглицеролата кремния по золь-гель методологии. Проведены экспериментальные исследования по выбору оптимального соотношения компонентов – тетраглицеролат кремния : моноглицеролат цинка : глицерин : вода для получения гидрогелей, стабильных к синерезису. Исследовано влияние мольного содержания воды, pH среды и гелеобразующих добавок на процесс гелеобра-

зования. Выбраны оптимальные условия синтеза и составы гидрогелей. Установлены общие физико-химические закономерности и выявлены особенности золь-гель процесса для кремний- и цинксодержащих прекурсоров.

Предварительные фармакологические исследования гидрогелей показали нетоксичность, выраженную ранозаживляющую, регенерирующую и антибактериальную активность и перспективность для дальнейшего углубленного изучения с целью внедрения в медицинскую практику.

1. Пат. РФ 2255939, 2005 г., бюл. изобрет. №19.

2. Пат. РФ 2322448, 2008 г., бюл. изобрет. №11.

3. Пат. РФ 2382046, 2010 г., бюл. изобрет. №5.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Президиума РАН программа № 12-П-3-1030 и Президиума УрО РАН программа № 13-3-НП-682.*

## **СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОСТЬ НУКЛЕОФИЛЬНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ МЕТАНОЛА К ЭТИНИЛБЕНЗОЛУ В СУПЕРОСНОВНОЙ СРЕДЕ КОН/DMSO**

*Витковская Н.М.<sup>(1)</sup>, Скитневская А.Д.<sup>(1)</sup>,  
Ларионова Е.Ю.<sup>(1)</sup>, Трофимов Б.А.<sup>(2)</sup>*

<sup>(1)</sup> Иркутский государственный университет  
664003, г. Иркутск, ул. Карла Маркса, д. 1

<sup>(2)</sup> Иркутский институт химии СО РАН  
664033, г. Иркутск, ул. Фаворского, д. 1

Традиционно считается, что нуклеофильное присоединение к ацетиленовой тройной связи осуществляется *транс*-стереоселективно. Однако присоединение нуклеофилов к активированным ацетиленовым углеводородам в каталитической суперосновной среде КОН/DMSO идет нестереоспецифично, так при винилировании метанола этинилбензолом образуется смесь *E*- и *Z*-изомеров 2-метоксиэтинилбензола в соотношении 5:2 [1].

В рамках подхода MP2/6-311++G\*\*//B3LYP/6-31G\* построено сечение поверхности потенциальной энергии (ППЭ) реакции  $\beta$ -присоединения метанола к этинилбензолу в суперосновной системе КОН/DMSO. Специфическое взаимодействие супероснования с реакционным центром моделирует явное включение в расчет каталитической